(13)回転ブラウン運動と双極子相関関数について(基研長期研究計画「非線型非平衡状態の統計力学」,研究会報告)

森田, 昭雄

(13)　回転ブラウン運動と双極子相関関数について

秋田大・教育　森　田　昭　雄

非対称ゴマの回転ブラウン運動に対する確率微分方程式は次のようになる：

$$\frac{d}{dt}\omega_x(t)-\frac{I_y-I_z}{I_x}\omega_y(t)\omega_z(t)=-\beta_x\omega_x(t)+A_x(t)+\frac{1}{I_x}N_x(\theta,\phi,\psi) \tag{1}$$

$$\frac{d}{dt}\omega_y(t)-\frac{I_z-I_x}{I_y}\omega_z(t)\omega_x(t)=-\beta_y\omega_y(t)+A_y(t)+\frac{1}{I_y}N_y(\theta,\phi,\psi) \tag{2}$$

$$\frac{d}{dt}\omega_z(t)-\frac{I_x-I_y}{I_z}\omega_x(t)\omega_y(t)=-\beta_z\omega_z(t)+A_z(t)+\frac{1}{I_z}N_z(\theta,\phi,\psi) \tag{3}$$

$$\frac{d}{dt}\theta(t)=\omega_x\cos\psi-\omega_y\sin\psi \tag{4}$$

$$\frac{d}{dt}\phi(t)=\frac{1}{\sin\theta}(\omega_x\sin\psi+\omega_y\cos\psi) \tag{5}$$

$$\frac{d}{dt}\psi(t)=\omega_z(t)-\cot\theta(\omega_x\sin\psi+\omega_y\cos\psi) \tag{6}$$

ここで，$\omega_i(t)$ $(i=x,y \text{ or } z)$ はコマの角速度，I_i は慣性モーメント，$I_i\beta_i\omega_i(t)$はダンピング・トルク，$I_iA_i(t)$はランダム・トルク，$N_i(\theta,\phi,\psi)$は外部トルクであり，(θ,ϕ,ψ) はオイラー角を表わす。

(1)－(6) の運動方程式より Fokker-Planck-Kramers の式を確率密度関数$W(\theta,\phi,\psi,\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)$ に対して作ると次のようになる：

$$\Big\{\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{j=x,y,z}\Big(i\omega_j L_j-\beta_j\frac{\partial}{\partial\omega_j}\omega_j+\frac{k_BT}{I_j}\frac{\partial}{\partial\omega_j}\Big)$$
$$+\sum_{i,j,k}\Big[\frac{1}{I_j}\omega_j\omega_k(I_j-I_k)+N_i\frac{\partial}{\partial\omega_i}\Big]\Big\}W=0, \tag{7}$$

ここで，k_B はボルツマン定数，T は絶対温度,(i,j,k) は cyclic permutation，そして L_i は角運動演算子で，

$$L_x=\frac{1}{i}\left(\cos\psi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\sin\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\cot\theta\sin\psi\frac{\partial}{\partial\psi}\right) \tag{8}$$

$$L_y=\frac{1}{i}\left(-\sin\psi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\cot\theta\cos\psi\frac{\partial}{\partial\psi}\right) \tag{9}$$

$$L_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} \tag{10}$$

である。

今回は剛体の任意の永久双極子mの主軸方向への成分(m_x, m_y, m_z)としたとき，空間に固定した座標系(ξ,η,ζ)のζ軸への射影，m_ζの相関関数$\langle m_\zeta(0)\,m_\zeta(t)\rangle$を(7)より得たので報告した。但し

$$m_\zeta(t)=m_x\sin\theta\,\sin\psi+m_y\sin\theta\cos\psi+m_z\cos\theta$$

の関係がある。

詳細は近く発表予定である。